

В.С. СУЗДАЛЬ, д-р. техн. наук,
Ю.М. ЕПИФАНОВ, канд. техн. наук,
Л.И. ГЕРАСИМЧУК, канд. техн. наук,
И.И. ТАВРОВСКИЙ (Институт сцинтилляционных материалов
 НАН Украины),
Л.В. ДЕРБУНОВИЧ, д-р. техн. наук, проф. каф. АУТС НТУ "ХПИ"

АЛГОРИТМ АДАПТАЦИИ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССОМ ВЫРАЩИВАНИЯ КРУПНОГАБАРИТНЫХ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ

В статті розглянуто алгоритми адаптивного управління технологічним процесом вирощування методом Чохральського сцинтиляційних монокристалів великих розмірів; визначені задачі управління і пошуку оптимальних параметрів теплового режиму установок типу "РОСТ"; застосування розроблених методів і засобів дозволило підвищити вихід придатної продукції на 15÷20%

In this paper viewing algorithms of adaptive control for Czochralski technological process growing of large single crystals; was define problems of control and searching optimal heat conditions for growth plant type "ROST"; carrying out of useful productions was increased on 15÷20% by using this methods and tools.

Постановка проблемы. Достигнутые в области выращивания крупногабаритных сцинтилляционных монокристаллов (МК) результаты [1,2] не являются окончательными. В настоящее время проводятся работы, направленные на дальнейшее совершенствование технологических аспектов роста МК и методов управления процессами их получения.

Процесс выращивания МК методом Чохральского характеризуется известным числом n основных технологических переменных $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, n$. Необходимая и достаточная совокупность $\{x_i\}$, определяющая ход процесса выращивания кристалла, связана системой дифференциальных уравнений [3]:

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n, \frac{dx_1}{dt}, \frac{dx_2}{dt}, \dots, \frac{dx_n}{dt}, t, C); \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (1)$$

решения которой физически реализуемы, если устойчивы решения линейаризованной системы:

$$\frac{d}{dt}(\delta x_i) = \sum_{k=1}^n \frac{df_i}{dx_k} \cdot \delta x_k. \quad (2)$$

В моделях (1)-(2) частные производные определяют при $x_k = x_{k0}$; C – это совокупность регулируемых параметров технологического процесса

(ТП) и констант, характеризующих кристаллизующее вещество; $\delta x_k = x_k - x_{k0}$, $\delta x_i = x_i - x_{i0}$.

Поскольку растущий кристалл в ходе процесса Чохральского не имеет контакта со стенками тигля, а форма и размер образца определяют капиллярными силами и условиями тепломассообмена в системе кристалл–расплав, то к основным параметрам ТП относят характерный размер (радиус R) цилиндрического образца и положение h фронта кристаллизации (ФК) относительно свободной поверхности расплава. Входящие в систему (1) уравнения для скоростей изменения поперечного сечения кристалла и положения ФК имеют вид:

$$\frac{d}{dt}(\delta R) = -v \cdot \sum_{k=1}^n \frac{d\alpha_0}{dx_k} \cdot \delta x_k \quad (3)$$

$$\frac{d}{dt}(\delta h) = \frac{1}{L} \cdot \sum_{k=1}^n \left[\lambda_s \frac{\partial G_s}{\partial x_k} - \lambda_\ell \frac{\partial G_\ell}{\partial x_k} \right] \cdot \delta x_k. \quad (4)$$

Здесь v – скорость вытягивания МК, α_0 – угол между касательной к мениску расплава с горизонталью в тройной точке, L – скрытая теплота плавления единицы объема вещества, λ_s, λ_ℓ – удельные теплопроводности твердой и жидкой фаз, соответственно, G_s, G_ℓ – градиенты температур на ФК в кристалле и расплаве.

Из (3)-(4) следует, что динамическая устойчивость системы кристалл-расплав в методе Чохральского определяется капиллярными и тепловыми условиями. Поскольку капиллярные условия в методе Чохральского фиксированы, то динамической устойчивостью системы управляют, изменяя тепловые условия по модели [3, С. 44]:

$$\frac{1}{\kappa_i} \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{d^2 T_i}{dz^2} - \frac{V}{\kappa_i} \cdot \frac{dT_i}{dz} - (\mu_i / \lambda_i) \cdot F \cdot T_i, \quad (5)$$

где $i \in \{\ell, s\}$ – индексы: ℓ – расплав, s – кристалл; $T_i = T_i' - T_c - T_i'$, T_c – температура в расплаве или кристалле и окружающей среде), $\kappa_i, \mu_i, \lambda_i$ – коэффициенты температуропроводности, теплообмена с окружающей средой и теплопроводности, соответственно, F – отношение периметра поперечного сечения кристалла (мениска расплава) к его площади, z – осевая координата.

Как показано в [3], уравнение (5) хорошо описывает истинное распределение температуры при значениях коэффициента Био: $\mu_i \cdot R / \lambda_i < 1$, когда коэффициенты теплоотдачи с поверхности кристалла (расплава) имеют малые значения, а теплопроводность – большие, и, по меньшей мере, качественно правильно в иных случаях.

Система уравнений (1) достаточно легко разрешается для стацио-

нарных условий, т.е. при выращивании кристалла с постоянным сечением и фиксированным положением ФК, когда модель имеет вид:

$$f_i(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0}, t, C) = 0, \quad (6)$$

чему препятствуют, наряду с другими факторами, увеличение по мере роста МК его длины и понижение при этом уровня расплава в тигле.

Возможно решение системы (2) вблизи стационарного состояния (при малых отклонениях δx_k), поскольку время значимого изменения технологических параметров в результате роста МК намного превышает продолжительность переходных процессов в системе кристалл-расплав. С этой точки зрения, для установок типа "РОСТ", где в результате подпитки [2,4] уровень расплава в тигле на протяжении всего процесса выращивания МК сохраняется постоянным, квазистационарное приближение более обосновано, чем для обсуждаемой в [3] технологической схемы Чохральского.

Кроме того, стационарное состояние в ростовой системе, когда распределение температуры вблизи ФК практически не зависит от длины образца, достигается довольно быстро для МК полупроводников и диэлектриков с малой теплопроводностью (германий, [3]). Поскольку щелочно-галогенидные МК (например, кристаллы KCl – диэлектрики с ионным типом связи) более пластичны, чем германий, имеют существенно меньшую теплопроводность и на порядок более высокий коэффициент линейного теплового расширения, то стационарное состояние при их выращивании на установках "РОСТ" должно устанавливаться еще быстрее.

С другой стороны, при выращивании крупногабаритных МК с увеличением длины растущего образца возникают дополнительные возмущения, связанные, прежде всего, с изменением характера теплообмена в системе кристалл-расплав. Значимость этого фактора обусловлена большим поперечным сечением растущего МК (~530 мм), относительно малыми градиентами температур ($\leq 15^\circ\text{C}/\text{см}$) и влиянием эффекта наследования субструктуры [1, С.476]. Таким образом, разработка алгоритмов управления, обеспечивающих устойчивость процесса кристаллизации и минимизирующих влияние изменения характера теплообмена в системе кристалл-расплав на качество выращиваемых крупногабаритных монокристаллов является актуальной задачей.

Анализ литературы. Особенности динамики объекта управления при изменении тепловых условий в ходе ТП выращивания МК больших размеров обсуждаются в [1, 2]. Оценка результатов повышения качества управления в условиях дискретного метода выращивания МК дана в [5]. Новые элементы СУ выращивания МК методом Чохральского, разработанные в ИСМА НАН Украины для управления этими ростовыми установками, представлены в [6,7]. Некоторые подходы к реализации алго-

ритмов управления с помощью современных программных средств рассмотрены в [8], применительно к процессу роста крупногабаритных МК – в [9]. Решение в [10] задачи прогнозирования управляющих сигналов, формируемых в режиме реального времени, направлено на обеспечение наиболее рациональных тепловых условий роста МК больших размеров. Анализ этих работ [11] показывает, что применение традиционных алгоритмов для стабилизации диаметра крупногабаритных МК в процессе их выращивания недостаточно эффективно в связи с особенностями динамики объекта управления.

Целью статьи является разработка алгоритма адаптации управления к изменяющимся условиям процесса выращивания крупногабаритных МК.

Характеристика процесса управления. При выращивании крупногабаритных МК дискретным методом [1] из вращающегося тигля с расплавом достаточно эффективен способ управления [5] (рис. 1, табл. 1). В процессе роста МК автоматически поддерживают в тигле постоянный уровень расплава, подпитывая его исходным сырьем, которое предварительно подают в расположенную коаксиально тиглю кольцевую емкость для расплавления. Температуру в ростовой печи корректируют по сигналу датчика уровня расплава [4].

Общее время Δt_0 цикла (рис. 2), по которому можно рассчитать среднюю скорость роста МК $v_{p1} = \Delta h_k / \Delta t_0$ за счет дискретного его вытягивания на высоту Δh_k , определяется суммой Δt_i ; $i = 1, \dots, 4$ (табл. 1). По скачкообразному изменению уровня расплава Δh после дискретного вытягивания на Δh_k судят об изменении диаметра МК [1, С. 317]:

$$d_s = D \cdot [\Delta h / (\Delta h + \Delta h'_k)]^{1/2}, \quad (7)$$

где d_s – текущее значение диаметра МК, D – диаметр тигля; $\Delta h'_k$ – измеренное значение дискретного вытягивания МК.

Диаметром растущего МК управляют, изменяя тепловые условия выращивания. На установках типа "РОСТ" для этого управляют температурой донного нагревателя T_d в зависимости от ошибки управления диаметром кристалла $S = (d - d_s)$. Коррекция T_d обеспечивается регулятором 13 (рис. 1).

Величина приращения управляющего воздействия ΔT_d в канале регулирования диаметра МК вычисляется по выражению:

$$\Delta T_d = k_d \cdot (S + \frac{\Delta t_0}{T_{\text{и}}} \sum_i S), \quad (8)$$

где k_d , $T_{\text{и}}$ – коэффициент пропорциональности и время интегрирования ПИ-регулятора диаметра.

Как показали исследования, изменение положения цилиндрического образца с большим диаметром поперечного сечения относительно тигля

(вследствие изменения длины l МК в процессе его роста) существенно влияет на условия теплопередачи в системе кристалл - расплав.

Таблица 1 – Параметры процесса выращивания МК и системы управления

| Обозначение, параметр | |
|-----------------------|--|
| Δh_k | высота дискретного подъема МК (заданное значение), мм |
| Δh_0 | падение уровня расплава после дискретного подъема МК (заданное значение), мм |
| h_3 | значение уровня расплава после подпитки, мм |
| D | диаметр тигля, мм |
| d | диаметр МК (заданное значение), мм |
| v_{p2} | скорость роста МК за счет падения уровня расплава (среднее значение), мм/час |
| v_ϕ | скорость изменения уровня расплава (фактическое значение), мм/час |
| Δt_0 | продолжительность цикла управления, с |
| Δt_1 | время дискретного подъема МК на величину Δh_k , с |
| Δt_2 | время регулирования температуры донного нагревателя, с |
| Δt_3 | время подпитки, с |
| Δt_4 | время выдержки после подпитки, с |
| T_6, T_d | температура бокового и донного нагревателей, в Δt |
| U_6, U_d | управляющее воздействие на температуру бокового и донного нагревателей |

Действительно, на первом этапе, на стадии роста МК с переменным диаметром (затемненная область на рис. 3), когда образец целиком находится внутри тигля, кристалл подогревается за счет тепла, излучаемого боковой поверхностью тигля. При этом осуществляют управляемое снижение температуры донного нагревателя от момента включения управления $T_{д.упр.}$ до минимального значения $T_{д.min.}$, при котором МК начинает выходить за верхний уровень боковой поверхности тигля. Как показано в [1], положение T_{dmin} на оси абсцисс графика $T_d(l)$ зависит при прочих равных условиях от прозрачности к излучению слоя сублимата испарившегося расплава на кристалле и стенках ростовой камеры. Значение T_{dmin} , точнее, превышение этого значения над величиной температуры плавления вещества выращиваемого МК определяет возможность формирования необходимого температурного поля, устойчивость процесса кристаллизации и качество получаемого продукта. В целом, для обеспечения оптимального теплового режима разрачивания МК по диаметру температура T_d должна снизиться на (20-30)°С, а теплопередача донного нагревателя – уменьшиться [12].

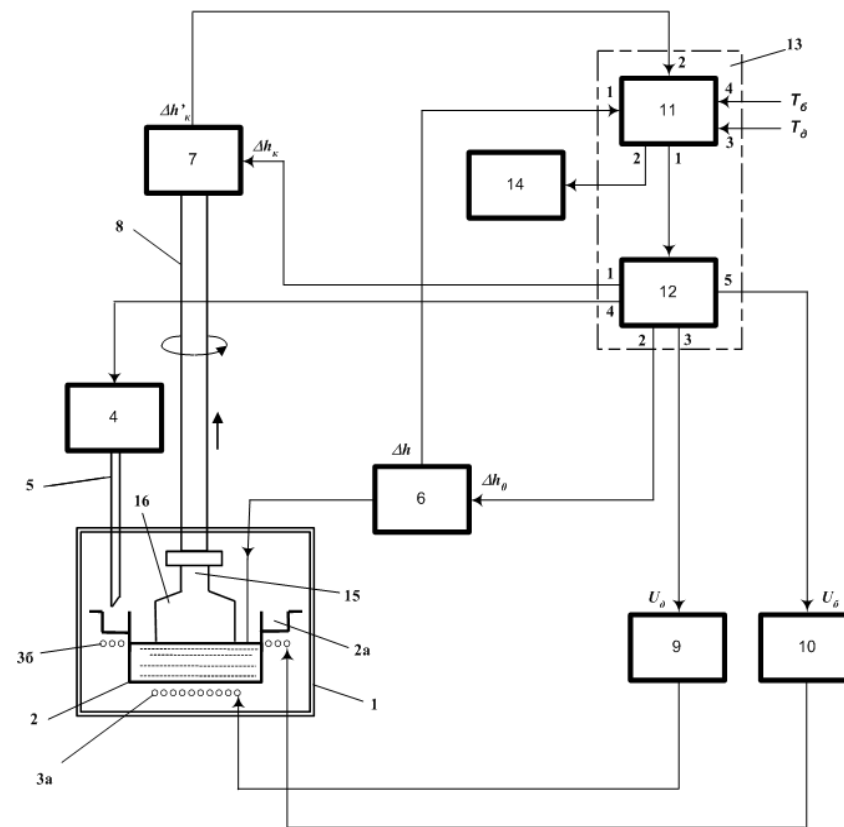


Рис. 1. Схема управления ростом МК:

1 – ростовая печь; 2 – тигель с кольцевой полостью 2а для плавления сырья; 3а, 3б – донный и боковой нагреватели; 4 – питатель с транспортной трубкой 5; 6 – датчик уровня расплава; 7 – блок управления перемещением кристаллодержателя 8; 9, 10 – блоки коррекции T_d и T_6 ; 11, 12 – блоки расчета параметров и управления регулятора 13 диаметра МК; 14 – устройство отображения информации; 15 – заправка; 16 – МК

На стадии роста образца с постоянным диаметром (цилиндрической части МК) кристалл выходит за кромку тигля в более холодную часть ростовой камеры, охлаждаемой водой, и отдает тепло стенкам камеры. Для обеспечения температуры расплава, соответствующей оптимальным условиям кристаллизации, температура донного нагревателя должна увеличиваться. Разница между T_{dmin} и температурой $T_{дк}$ (рис. 3), фиксируемой в конце роста МК, достигает (50÷70)°С, а теплопередача донного

нагревателя в этот период возрастает [12].

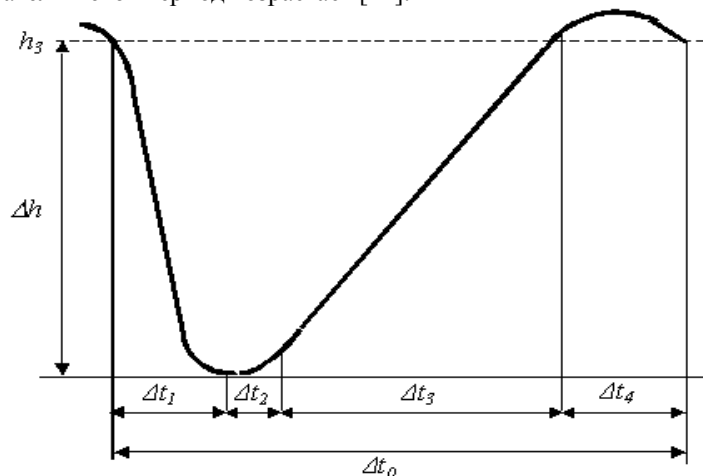


Рис. 2. Изменение уровня расплава в зависимости от режима работы ростовой установки [1, С. 435]

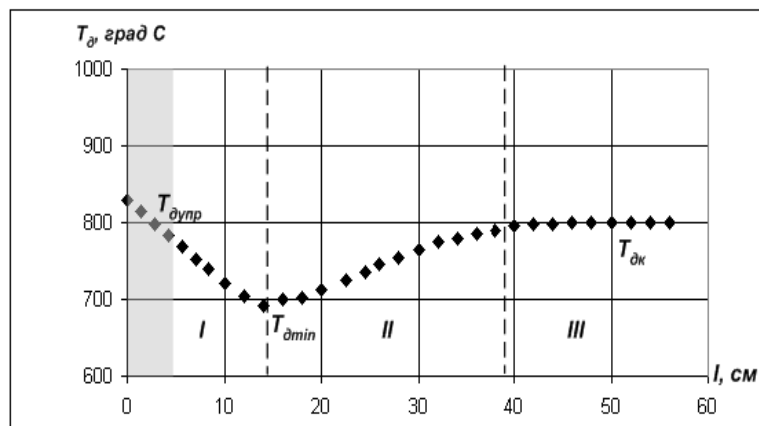


Рис. 3. Изменение температуры донного нагревателя в процессе роста МК NaI(Tl) на промышленной установке типа "РОСТ"

Игнорирование нестационарности процесса выращивания крупногабаритных монокристаллов при формировании управляющих воздействий на температуру расплава приводит к ухудшению качества управления диаметром растущего МК. Чтобы этого не происходило, зависимость (8) уточняется:

$$\Delta T_{di} = k_d \cdot N_{ij} \cdot (S_i + \frac{\Delta t_0}{T_n} \sum_i S_i); I = 1, \dots, I; j \in \{1, 2\}, \quad (9)$$

где j – индекс этапа изменения температуры донного нагревателя (рис. 3); коэффициент N_{ij} принимает значения из множества $\{1, 0; 1, 15; 0, 9\}$ в зависимости от того, в какой из трех областей I-III происходит изменение температуры донного нагревателя в рассматриваемый момент управления, при этом изменение температуры донного нагревателя в течение одного цикла управления ограничено: $|\Delta T_{di}| \leq (0,3 \div 0,5)^\circ\text{C}$.

Не менее важное значение имеет в установках типа "РОСТ" управление боковым нагревом (рис. 1).

Известно [1], что в процессе роста МК температура бокового нагревателя снижается в зависимости от текущей температуры донного нагревателя. Процедура адаптации [8] в системе управления ростом в этих условиях, как правило, реализуется оператором вручную (в лучшем случае, при наличии программного регулятора температуры T_b , кусочно-линейными участками) с использованием для этой цели эвристических алгоритмов, имеющих достаточно субъективный характер.

Применение двухканального, автономного регулирования температуры донного и бокового нагревателей, судя по практическим результатам, повышает качество выращиваемого МК, однако соответствующие воздействия формируются и осуществляются в независимые друг от друга моменты времени, что приводит к отсутствию между управлениями необходимого согласования.

Адаптивный алгоритм. Анализ динамики временных рядов T_b и T_d для целого ряда выращиваний на установке "РОСТ-5" однотипных кристаллов NaI(Tl) с диаметром ~ 500 мм позволил предположить наличие их значимой корреляции на протяжении каждой реализации ТП. Результаты обработки данных (например, рис. 4), полученных в режиме реального времени с помощью SCADA-системы ТРЕЙС МОУД [9], свидетельствуют об устойчивом характере изменения в процессе роста МК соотношения $\theta = T_b/T_d$ которое с достаточной степенью точности может служить косвенным критерием качества управления этим процессом.

Тогда задача оптимизации процесса снижения температуры бокового нагревателя на $(i+1)$ -м шаге сводится к поиску такого значения $T_{b(i+1)}$, которое определено зависимостью:

$$\Delta T_{b(i+1)} = \theta_{i+1} \cdot \Delta T_{di}, \quad (11)$$

где θ_{i+1} – значение косвенного показателя качества управления, предсказанное в предшествующем временном интервале по расчетной модели, ΔT_{di} – изменение температуры донного нагревателя в этом интервале. На изменение T_b в течение одного цикла Δt наложено ограничение: $|\Delta T_{bi}| \leq (0 \div 0,5)^\circ\text{C}$.

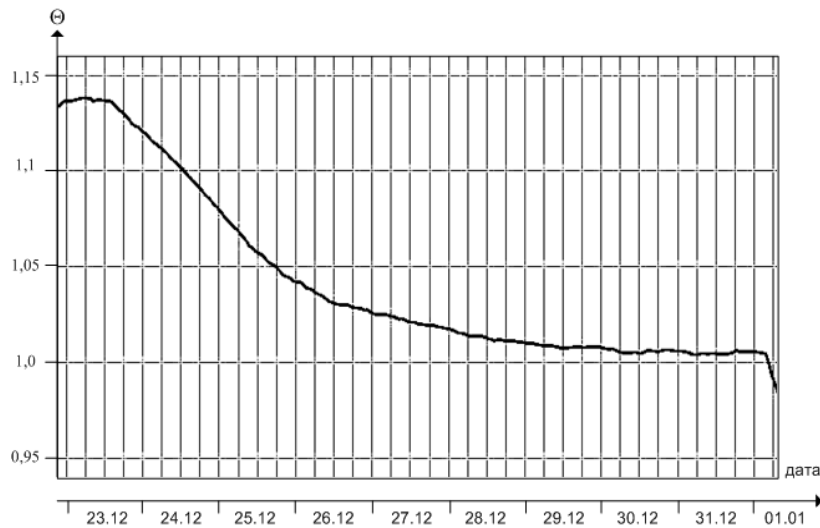


Рис. 4. Изменение соотношения $\theta = T_{\theta}/T_d$ в процессе выращивания МК $NaI(Tl)$ в период с 23.12.06 г. по 01.01.07 г.

Оценивание параметров модели. Задача оценивания параметров модели $\theta(t)$ решена с использованием рекуррентного фильтра с растущей памятью, который помимо высокой эффективности (качество фильтрации повышается с ростом числа членов временного ряда) достаточно экономичен. Текущая оценка $\hat{\theta}_i$ [13]:

$$\hat{\theta}_i = \bar{\theta}_i + P_n^{-1} h_0^T \cdot (z_i - h_0 \cdot \bar{\theta}_i), \quad (12)$$

где $\bar{\theta}_i$ – прогнозное значение θ_i , определенное на предшествующем шаге; h_0 – вектор $(1, 0, \dots, 0)$ с $(r+1)$ компонентами; z_i – измеренный сигнал; $P_n^{-1} h_0^T$ – вектор весовых коэффициентов корректирующего члена $(z_i - h_0 \cdot \bar{\theta}_i)$.

Вследствие большой инерционности процесса выращивания МК, условия применения (12) соблюдаются при малом числе $(r+1)$ членов разложения $\theta(t)$ в ряд Тейлора в окрестностях τ (модель помехи – "белый шум"). Обработка данных (рис. 4) по алгоритму

$$\hat{\theta}_{i+1} = \hat{\theta}_i + m \cdot \hat{\theta}_i', \quad (13)$$

где m – интервал предсказания, $\hat{\theta}_i'$ – оценка производной θ_i ($\hat{\theta}_i' = \hat{\theta}_i + 6 \cdot (z_i - \bar{\theta}_i) / [n(n+1)]$), дает среднюю относительную ошибку оценивания θ_{i+1} (при $r = 1$) не хуже $4 \cdot 10^{-3}$.

Применение рассмотренных методов при управлении процессом вы-

ращивания крупногабаритных МК на установках типа "РОСТ" на опытном предприятии ИСМА в совокупности с прежде разработанными программно-техническими средствами обеспечило стационарный рост кристаллов и повышение выхода годной продукции на 15÷20%.

Выводы. При выращивании крупногабаритных МК на установках типа "РОСТ" управляющие воздействия направлены на обеспечение стационарных условий роста кристалла, однако формируются без учета действующих в системе возмущений. Изменение положения образца относительно неподвижного по вертикали тигля при больших его размерах приводит к значительному увеличению площади теплообмена в системе кристалл-расплав и, как следствие, температуры нагревателей, поддерживающих соответствующую температуру расплава. С увеличением длины растущего образца возникают дополнительные возмущения, связанные с изменением характера теплообмена в системе кристалл-расплав. С учетом влияния этих факторов на процесс выращивания МК разработаны эффективные алгоритмы адаптивного управления тепловым режимом ростовых установок.

Список литературы: 1. Горилецкий В.И., Гринев Б.В., Заславский Б.Г., Смирнов Н.Н., Суздаль В.С. Рост кристаллов. – Харьков: АКТА, 2002. – 535 с. 2. Суздаль В.С., Стадник П.Е. Системы управления процессами получения монокристаллов из расплава// Функциональные материалы для науки и техники. – Харьков: Институт монокристаллов, 2001. – С.514-526. 3. Татарченко В.А. Устойчивый рост кристаллов. – М.: Наука, 1988. – 310 с. 4. Артеменко М.П., Епифанов Ю.М., Гринев Б.В., Суздаль В.С., Горилецкий В.И., Тавровский Л.И., Стрельников М.И. Пристрій для підживлення вирощуваного монокристалу. – Заявка №200505340; Заявл. 06.06.05. 5. Способ выращивания МК/ заявка № 200608425 от 27.07.06/ Суздаль В.С., Епифанов Ю.М., Герасимчук Л.И. и др. 6. Горилецкий В.И., Епифанов Ю.М., Гринев Б.В., Суздаль В.С., Герасимчук Л.И., Звягинцев В.М. Пристрій для регулювання росту монокристалів. – Пат. 30878А Україна. – Заявл. 16.06.1998; Надрук. 15.12.2000, Бюл. №7. – Ч. II. 7. Суздаль В.С., Дербунович Л.В., Герасимчук Л.И., Епифанов Ю.М., Трипольский А.А. Алгоритмы управления процессом выращивания сцинтилляционных монокристаллов больших размеров// Вісник національного технічного університету "ХПІ" - 2005 р. - №56. - С.22-32. 8. Мазуров В.М., Литюга А.В., Ницын А.В. Развитие технологий адаптивного управления в SCADA системе TRACE MODE// Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. – 2002. – №1. – С. 28. 9. Suzdal V.S., Arthemenko M.P. Visualization of the data in control systems of process of cultivation of monocrystals - "Crystal Materials'2005" (ICCM'2005); Abstracts book. - Kharkov, STC "Institute for Single Crystals". – 2005. – Р. Р-159. 10. Дербунович Л.В., Герасимчук Л.И., Суздаль В.С., Соболев А.В. Прогнозное управление процессом выращивания сцинтилляционных монокристаллов. – Вестник национального технического университета "ХПИ". Тематический выпуск "Проблемы автоматизированного электропривода. Теория и практика" - 2005. – №45. – С.113-115. 11. Суздаль В.С. Синтез отказоустойчивых автоматизированных систем управления процессами выращивания высококачественных крупногабаритных монокристаллов/ Автореферат диссертации на соискание ученой степени д.т.н. - Харьков. – 2006 г. – 35 с. 12. Свенчанский А.Д. Электрические промышленные печи. Первая часть. – Л-д: "Госэнергоиздат". – 1958. – 288 с. 13. Коршунов Ю.М. Математические основы кибернетики. – М.: Энергоатомиздат. – 1987. – 437 с.

Поступила в редколлегию 10.10.2007